

- 시험시간: 10:30 AM - 12:30 PM 3시간 반
- 시험지: 1장 (2쪽: 앞, 뒤쪽)
- 별지: 3장 (Character table: 3쪽, Symmetry-adapted orbitals: 3쪽)

1. 다음표의 빈칸을 채우시오. (답지에 아래의 table을 그리고 답을 적을 것. table을 그리지 않으면 무조건 0점)

원자번호	원소기호	이름	족 (Family)	주기 (Period)
27				
	Ge			
		Indium		
50				
	Er			
		Neptunium		

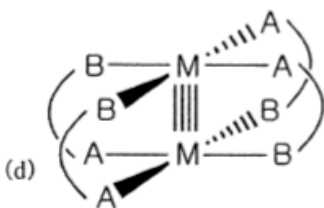
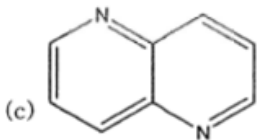
2. 다음 화합물들의 point group과 가지고 있는 모든 symmetry element들의 수와 종류를 정확히 적어라. 그리고 chirality가 있는지에 대하여도 말하라. 또한 화합물이 polar 한지 아닌지를 밝혀라.

* 다음의 table을 그리고 답을 적을 것. (답지에 table을 그리지 않으면 무조건 0점)

	Point group	Symmetry elements	Chirality	Polarity
(a)			yes or no	yes or no
(b)			:	:
:			:	:

(a) Chlorobenzene

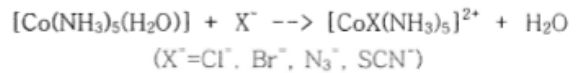
(b) 1,2,3-trichlorobenzene



3. 다음 착물의 구조를 그리고 이름을 적어라. 만일 기하 이성질체 (geometrical isomer)가 존재하면 가능한 모든 구조를 그리고 각각에 대하여 이름을 적어라. 그리고 각각의 구조에 대하여 광학적 활성 (optical activity)이 있는가에 대하여 답하라. (답지에 table을 그리지 않으면 무조건 0점)

	formula	structure	nomenclature	optically active ? yes or no
(a)	[Ni(CO) ₄] (Td 구조)		각각의 착물에 대하여	:
			존재하는 기하 이성질체의 수 만큼	:
(b)	[Cr(NCS) ₄ (NH ₃) ₂] ⁻ (Oh구조)		하 이성질체	:
			의 수 만큼	:
(c)	[CoCl ₂ (en)(NH ₃) ₂] ⁺ (Oh구조)		줄을 만들고	:
			답하라.	:
(d)	[PtCl ₂ (NH ₃) ₂] (Sq. Pl 구조)			:
				:

4. 다음의 ligand substitution 반응에서



반응 속도는 X⁻의 종류에 따라 큰 차이를 보이지 않는다. 반응 mechanism의 종류를 밝히고 그 근거를 설명하라.

==> 뒤 쪽에 5번 문제

5. $[\text{PtCl}_4]^{2-}$ 는 평면사각형 (square plane) 구조를 갖는 반자기성 (diamagnetic) 착물이다. 이 착물에 대하여 다음에 답하라. (주의, 5번 문제는 (b)의 답이 틀리면 그 이후는 무조건 0 점이 될 수 밖에 없는 구조로 되어 있다. 만일 (b)의 답을 모를 경우에는 5번 문제 만점의 5% 를 지불하고 답을 살 수 있다. 답을 원하는 학생은 조교로부터 구입하기 바람.)

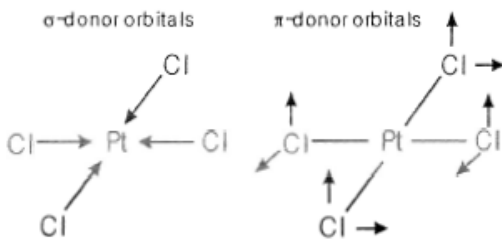
(a) Pt의 산화수는? 5d orbital에는 몇 개의 전자를 가지고 있는가?

(b) Point group은?

(c) 5d, 6s, 6p orbital들의 symmetry type은?

(d) Crystal Field Theory (CFT)에 의한 5d-orbital 에너지 준위의 갈라짐을 그려라. (설명할 필요는 없고 다만 그려라. orbital의 이름은 d_{xy} , d_{yz} 등의 형태가 아닌 **symmetry type**의 소문자로 됨에 유의하라.) 그리고 d-orbital electron configuration을 써라.

(e) ligand의 σ -donor orbital 들을 아래의 그림과 같이 4개의 화살표로 표시하자. 이로부터 4개의 σ -donor orbital 들이 (b)의 point group 속에서 어떻게 represent 되는지 알아보아라. (reducible representation의 character 값들을 찾으라는 문제)



(f) (e)의 reducible representation을 irreducible representation들의 합으로 표시하라. (답만 써라.)

(g) (c)와 (f)로부터 $[\text{PtCl}_4]^{2-}$ 의 molecular orbital (MO)들의 에너지 준위도를 그려라. (Ligand Field Theory (LFT))

(h) Pt의 5d orbital의 전자와 ligand의 σ -donor orbital에 있는 전자가 (g)의 MO에 들어갔을 때 전자배치 (electron configuration)를 써라.

(i) (g)에서 ligand의 σ -donor orbital 특성을 많이 가지고 있는 orbital들은 어느 것 인지 orbital의 이름을 써라.

(j) (g)에서 frontier orbital 들은 어느 것인지 써라.

(k) 별지에 주어진 Symmetry adapted orbitals의 그림을 참조하여 (j)의 frontier orbital들의 MO의 모양을 예측하여 그려라.

강의 시간에 Octahedral 구조의 착물에 대하여 CFT와 LFT에서 d-orbital의 에너지 준위 갈라짐을 예측하였고 두 경우 모두 같은 결과를 보임을 설명하였다. 그러나, $[\text{PtCl}_4]^{2-}$ 경우에는 Crystal field theory에 의하여 예측된 d-orbital의 갈라짐 ((d)의 답) 과 (g)의 frontier orbital들의 에너지 준위를 보면 서로 다름을 알 수 있다. 이에 대하여 좀 더 생각하여보자.

(l) Cl^- 는 σ -donor orbital 뿐 만 아니라 π -donor orbital도 가지고 있다. π -donor orbital 들을 위의 그림에서와

같이 z -C. 방향에 수직인 8 개의 화살표로 표시하자. 이로부터 8개의 π -donor orbital 들이 (b)의 point group 속에서 어떻게 represent 되는지 알아보아라. ((e)와 같은 유형의 문제)

(m) (l)의 reducible representation을 irreducible representation들의 합으로 표시하라. (답만 써라.)

(n) (g)의 frontier orbital과 ligand의 π -donor orbital로부터 출발하여 새로운 MO의 에너지 준위를 그려라. ((d)의 결과를 참조하여 그려라.)

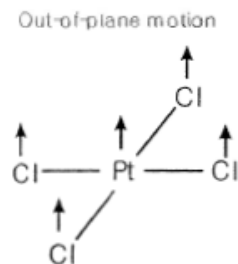
(o) d-orbital 전자와 ligand의 π -donor orbital의 전자를 (n)의 새로운 MO에 채울 때 electron configuration을 써라.

(p) (n)과 (o)의 결과로부터 ligand에 π -donor orbital이 존재할 때 frontier orbital 들의 에너지 준위는 어떻게 되는지 그려라. ((d)와 같은 결과 이어야 함.)

(q) 별지에 주어진 Symmetry adapted orbitals의 그림을 참조하여 (p)의 frontier orbital들의 MO의 모양을 예측하여 그려라.

(r) $[\text{PtCl}_4]^{2-}$ 의 vibrational mode는 모두 몇 개 인가?

(s) 다음의 그림은 $[\text{PtCl}_4]^{2-}$ 에 있는 각 원자의 out-of-plane motion을 5 개의 화살표로 표시 한 것이다. 이를 바탕으로 생각하면 $[\text{PtCl}_4]^{2-}$ 에서 out-of-plane vibrational mode는 모두 몇 개 인가? 또 in-plane vibrational mode는 모두 몇 개 인가?



(t) 위의 5개의 화살표가 (b)의 point group 속에 들어가면 어떻게 represent 되는지 알아보아라. ((e)와 같은 유형의 문제)

(u) (t)의 reducible representation을 irreducible representation들의 합으로 표시하라. (답만 써라.)

(v) (u)로부터 $[\text{PtCl}_4]^{2-}$ 의 out-of-plane translational motion의 symmetry type을 결정하라. 또 $[\text{PtCl}_4]^{2-}$ 의 x-, y-축을 중심으로한 rotational motion의 symmetry type을 결정하라.

(w) out-of-plane vibrational mode들의 symmetry type을 결정하고 각각이 IR-active 한지 Raman-active 한지 결정하라.

Character Tables

The groups C_1, C_s, C_i

C_1 (1)	E	$h = 1$	$C_s = C_h$ (mm)	E	σ_h	$h = 2$	$C_i = S_2$ (i)	E	i	$h = 2$
A	1		A'	1	1	x, y, R_z	A _g	1	1	$R_x, R_y, R_z, x^2, y^2, z^2, xy, yz, zx$
			A''	1	-1	z, R_x, R_y	A _u	1	-1	x, y, z

The groups C_n

C_2 (2)	E	C_2	$h = 2$	C_3 (3)	E	C_3	C_3^2	$\epsilon = \exp(2\pi i/3)$	$h = 3$
A	1	1	z, R_z	A	1	1	1	z, R_z	$x^2 + y^2, z^2$
B	1	-1	x, y, R_x, R_y	E	$\begin{pmatrix} 1 & \epsilon & \epsilon^2 \\ 0 & \epsilon & \epsilon \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$			$(x, y)(R_x, R_y)$	$(x^2 - y^2, xy)(zx, yz)$

C_4 (4)	E	C_2	C_4	C_4^3	$h = 4$
A	1	1	1	1	z, R_z
B	1	-1	1	-1	$x^2 - y^2, xy$
E	$\begin{pmatrix} 1 & i & -1 & -i \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 1 \end{pmatrix}$				$(x, y)(R_x, R_y)$

The groups C_{nv}

C_{2v} ($2mm$)	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$	$h = 4$
A ₁	1	1	1	1	z, x^2, y^2, z^2
A ₂	1	1	1	-1	R_z
B ₁	1	-1	1	-1	x, R_x, yz
B ₂	1	-1	-1	1	y, R_y, zx

C_{3v} ($3m$)	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	$h = 6$
A ₁	1	1	1	$z, x^2 + y^2, z^2$
A ₂	1	1	-1	R_z
E	2	-1	0	$(x, y)(R_x, R_y)$

C_{4v} ($4mm$)	E	$2C_2$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$	$h = 8$
A ₁	1	1	1	1	1	$z, x^2 + y^2, z^2$
A ₂	1	1	1	-1	-1	R_z
B ₁	1	-1	1	1	-1	$x^2 - y^2$
B ₂	1	-1	1	-1	1	xy
E	2	0	-2	0	0	$(x, y)(R_x, R_y)$

C_{6v}	E	$2C_3$	$2C_2$	$3\sigma_v$	$3\sigma_d$	$h = 12, \alpha = 72^\circ$
A ₁	1	1	1	1	1	$z, x^2 + y^2, z^2$
A ₂	1	1	1	-1	-1	R_z
E ₁	2	$2\cos\alpha$	$2\cos2\alpha$	0	0	$(x, y)(R_x, R_y)$
E ₂	2	$2\cos2\alpha$	$2\cos\alpha$	0	0	$(x^2 - y^2, xy)$

$C_{\infty v}$ ($6mm$)	E	$2C_3$	$2C_2$	$3\sigma_v$	$3\sigma_d$	$h = 12$
A ₁	1	1	1	1	1	$z, x^2 + y^2, z^2$
A ₂	1	1	1	-1	-1	R_z
B ₁	1	-1	1	1	-1	
B ₂	1	-1	1	-1	1	
E ₁	2	1	-2	0	0	$(x, y)(R_x, R_y)$
E ₂	2	-1	2	0	0	$(x^2 - y^2, xy)$

$C_{\infty h}$	σ	C_2	$2C_4$	$\sigma\sigma\sigma$	$h = \infty$
A ₁ (Σ^+)	1	1	1	1	$z, x^2 + y^2, z^2$
A ₂ (Σ^-)	1	1	1	-1	R_z
E ₁ (Π)	2	$2\cos\phi$	$2\cos2\phi$	0	$(x, y)(R_x, R_y)$
E ₂ (Δ)	2	$2\cos2\phi$	$2\cos\phi$	0	$(xy, x^2 - y^2)$

The groups D_n

D_2 (222)	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	$h = 4$
A	1	1	1	1	x^2, y^2, z^2
B ₁	1	1	-1	-1	z, R_z, xy
B ₂	1	-1	1	-1	y, R_y, zx
B ₃	1	-1	-1	1	x, R_x, yz

D_3 (32)	E	$2C_3$	$3C_2$	$h = 6$
A ₁	1	1	1	$x^2 + y^2, z^2$
A ₂	1	1	-1	z, R_z
E	2	-1	0	$(x, y)(R_x, R_y)$

The groups D_{nh}

D_{nh} (mm)	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	i	$\sigma(xy)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$	n	h
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
B_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	R_x	1
B_{2g}	1	1	1	1	1	1	1	1	R_y	1
B_{3g}	1	1	1	1	1	1	1	1	R_z	1
A_u	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1		
B_{1u}	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1		
B_{2u}	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1		
B_{3u}	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1		

D_{2h} (4mm)	E	$2C_2$	$2C_2'$	σ_h	$2S_2$	$2\sigma_v$	n	h
A_g	1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2, z^2$
A_g'	1	1	1	1	1	-1	1	R_z
E_g	2	1	0	2	1	0	2	(x, y) $(x^2 - y^2, xy)$
A_g''	1	1	1	1	1	-1	1	
A_g'''	1	1	-1	1	-1	1	1	2
E_g''	2	1	0	-2	1	0	2	(R_x, R_y) (xz, yz)

D_{2h} (4/mm)	E	$2C_2$	C_2'	$2C_2''$	i	$2S_6$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$	n	h
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2, z^2$
A_g'	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	R_z
B_{1g}	1	1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	$x^2 - y^2$
B_{2g}	1	-1	1	1	1	1	1	-1	1	1	xy
E_g	2	0	2	0	0	2	0	0	0	2	(R_x, R_y) (xz, yz)
A_g''	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	1	
A_g'''	1	1	1	-1	-1	1	-1	1	1	1	
B_{1u}	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	1	
B_{2u}	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	
E_u	2	0	-2	0	0	2	0	0	0	2	(x, y)

D_{2h}	E	$2C_2$	$2C_2'$	$2C_2''$	σ_h	$2S_6$	$2S_6^5$	σ_v	n	h
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2, z^2$
A_g'	1	1	1	1	1	1	1	1	1	R_z
E_g	2	$2 \cos \alpha$	$2 \cos 2\alpha$	0	2	$2 \cos \alpha$	$2 \cos 2\alpha$	0	2	(x, y)
E_g''	2	$2 \cos 2\alpha$	$2 \cos \alpha$	0	2	$2 \cos 2\alpha$	$2 \cos \alpha$	0	2	$(x^2 - y^2, xy)$
A_g''	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	
A_g'''	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	2
E_g'	2	$2 \cos \alpha$	$2 \cos 2\alpha$	0	-2	$-2 \cos \alpha$	$-2 \cos 2\alpha$	0	2	(R_x, R_y) (xz, yz)
E_g''	2	$2 \cos 2\alpha$	$2 \cos \alpha$	0	-2	$-2 \cos 2\alpha$	$-2 \cos \alpha$	0	2	

D_{2h} (6/mm)	E	$2C_6$	$2C_3$	C_2	$2C_2'$	$2C_2''$	i	$2S_6$	$2S_6^5$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$	n	h
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2, z^2$
A_g'	1	1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	R_z
B_{1g}	1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	1	1	1	
B_{2g}	1	1	1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	
E_{1g}	2	1	-1	-2	0	0	2	1	-1	-2	0	0	2	(R_x, R_y) (xz, yz)
E_{2g}	2	-1	-1	2	0	0	2	-1	-1	2	0	0	2	$(x^2 - y^2, xy)$
A_g''	1	1	1	1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	
A_g'''	1	1	1	1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	2
B_{1u}	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	
B_{2u}	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	
E_{1u}	2	1	-1	-2	0	0	2	-1	1	2	0	0	2	(x, y)
E_{2u}	2	1	-1	2	0	0	-2	1	1	-2	0	0	2	

D_{2d}	E	$2C_2$	$2C_2'$	$2C_2''$	$2C_2'''$	$2S_6$	$h = 8$
$A_1(2d)$	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2 + z^2$
$A_2(2d)$	1	1	1	1	1	1	
$A_3(2d)$	1	1	1	1	1	1	
$A_4(2d)$	1	1	1	1	1	1	
$E_1(2d)$	2	0	$2\cos\phi$	2	0	$2\cos\phi$	(R, R') (xy, xy')
$E_2(2d)$	2	0	$2\cos\phi$	2	0	$2\cos\phi$	(x, y)
$E_3(2d)$	2	0	$2\cos 2\phi$	2	0	$2\cos 2\phi$	(xy, xy')
$E_4(2d)$	2	0	$2\cos 2\phi$	2	0	$2\cos 2\phi$	

The groups D_{nd}

$D_{2d} \times V_d$	E	$2S_4$	C_2	$2C_2'$	$2\sigma_d$	$h = 8$	D_{2d}	E	$2C_2$	$2C_2'$	i	$2S_6$	$3\sigma_d$	$h = 12$
$(42m)$							$(3m)$							
A_1	1	1	1	1	1	$(x^2 + y^2, z^2)$	A_1	1	1	1	1	1	1	$(x^2 + y^2, z^2)$
A_2	1	1	1	-1	-1	R_1	A_2	1	1	-1	-1	-1	-1	R_2
B_1	1	-1	1	1	-1	$x^2 - y^2$	E_1	2	-1	0	2	-1	0	(R_1, R_2) $(x^2 - y^2, xy)$
B_2	1	1	1	-1	1	xy	A_{10}	1	1	1	-1	1	-1	
E	2	0	-2	0	0	(x, y) (xy, xy')	A_{10}	1	1	-1	1	1	1	z
						(R_1, R_2)	E_2	2	-1	0	2	1	0	(x, y)

D_{2d}	E	$2S_6$	$2C_2$	$2S_6'$	C_2	$4C_2$	$6\sigma_d$	$h = 16$
A_1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2, z^2$
A_2	1	1	1	1	1	1	-1	R_1
B_1	1	-1	1	1	1	1	1	
B_2	1	1	1	1	1	1	1	z
E_1	2	$\sqrt{2}$	0	$\sqrt{2}$	-2	0	0	(x, y)
E_2	2	0	2	0	2	0	0	$(x^2 - y^2, xy)$
E_3	2	$\sqrt{2}$	0	$\sqrt{2}$	2	0	0	(R_1, R_2) (xy, xy')

The cubic groups

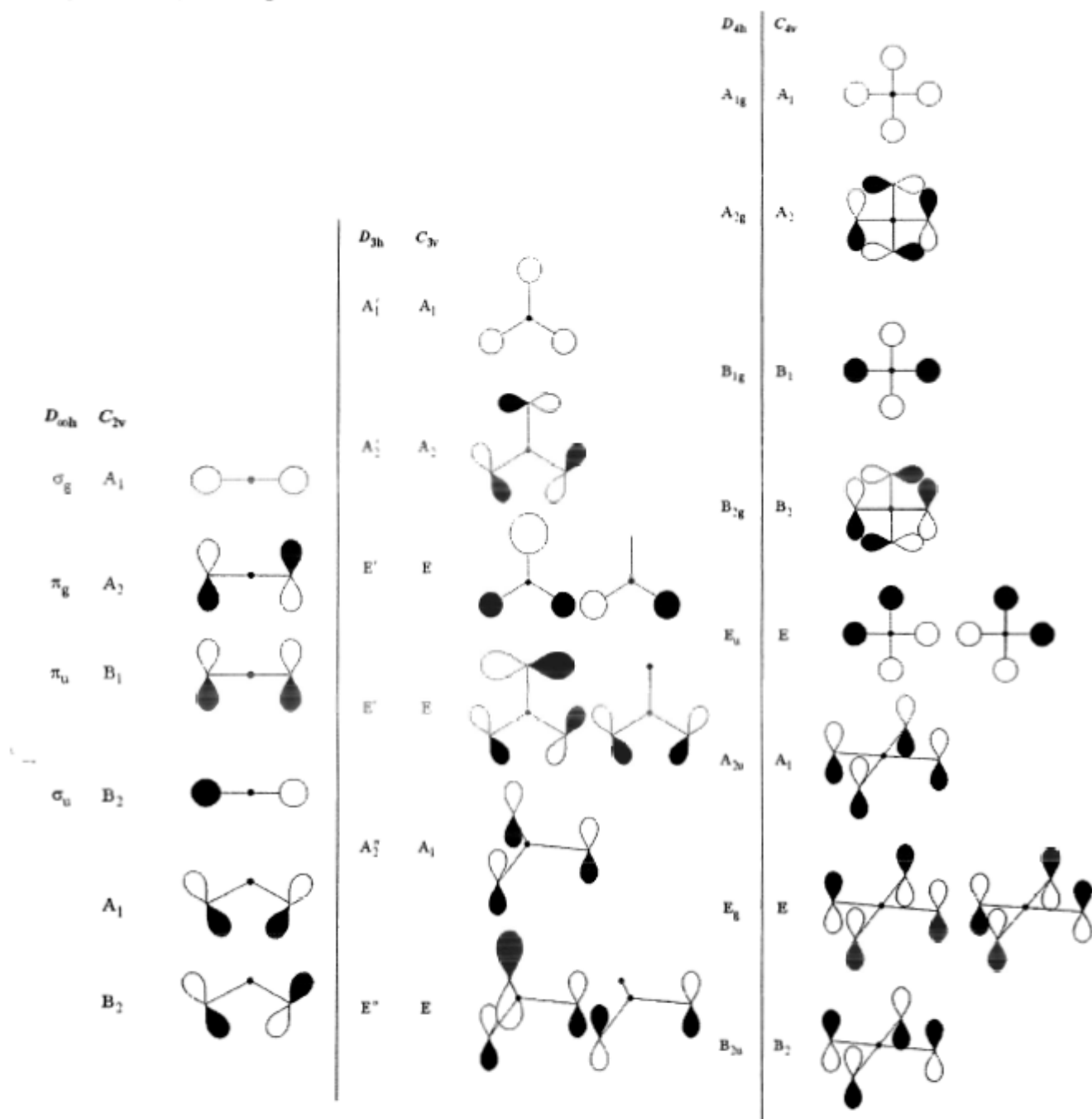
T_d	E	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$	$h = 24$
$(\bar{4}3m)$						
A_1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2 + z^2$
A_2	1	1	1	-1	-1	
E	2	-1	2	0	0	$(2x^2 - y^2 - z^2, x^2 - y^2)$
T_1	3	0	-1	1	-1	(R_1, R_2, R_3)
T_2	3	0	-1	-1	1	(x, y, z) (xy, yz, zx)

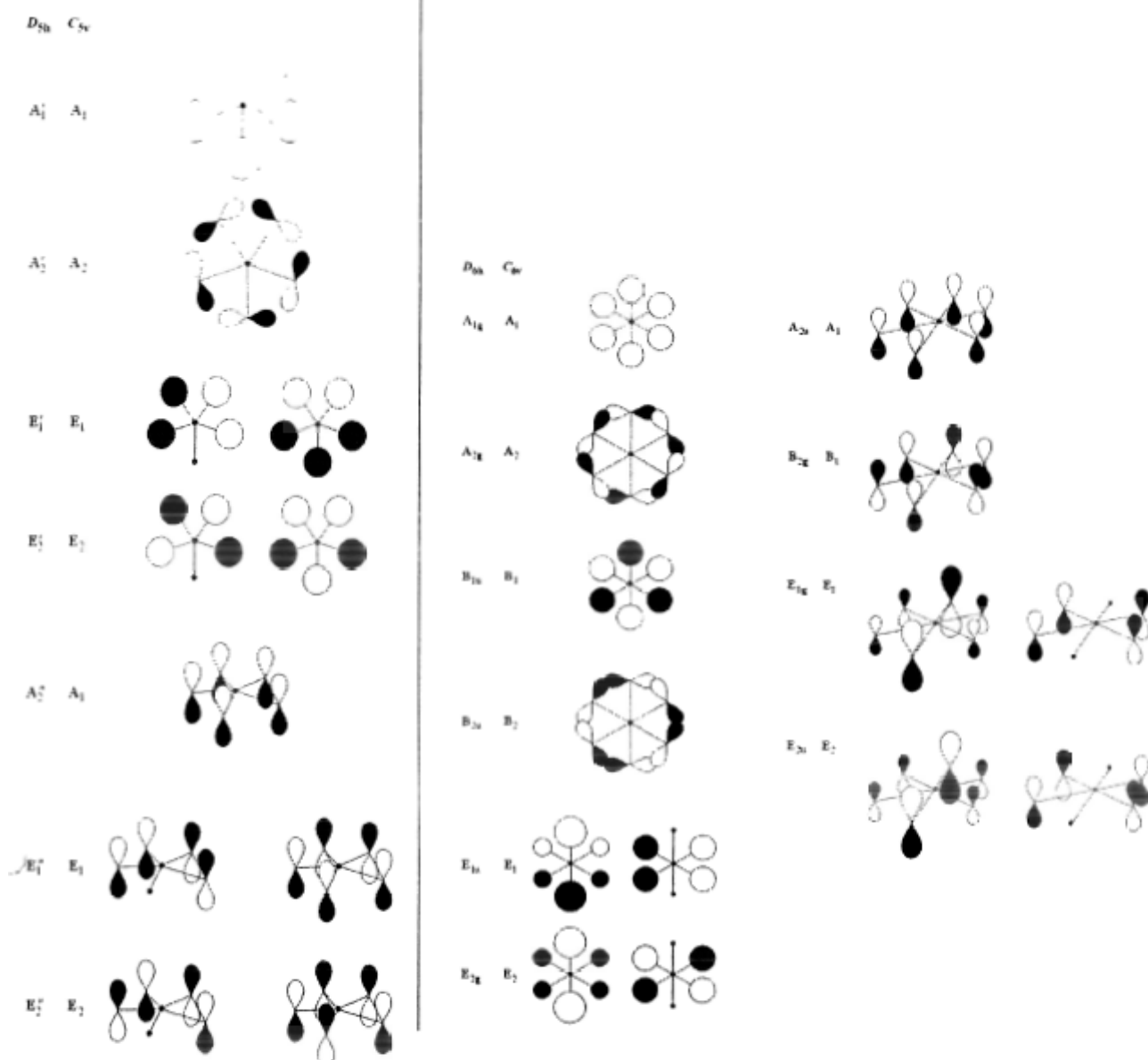
O_h	E	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2$	i	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$	$h = 48$
$(m\bar{3}m)$					$(= C_2)$						
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2 + z^2$
A_u	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1	
E_g	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0	$(2x^2 - y^2 - z^2, x^2 - y^2)$
T_{1g}	3	0	1	1	-1	3	1	0	-1	-1	(R_1, R_2, R_3)
T_{2g}	3	0	1	1	-1	3	-1	0	-1	1	(xy, yz, zx)
A_u	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	1	1	
A_g	1	1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	
E_u	2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0	
T_{1u}	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1	(x, y, z)
T_{2u}	3	0	1	1	-1	-3	1	0	1	-1	

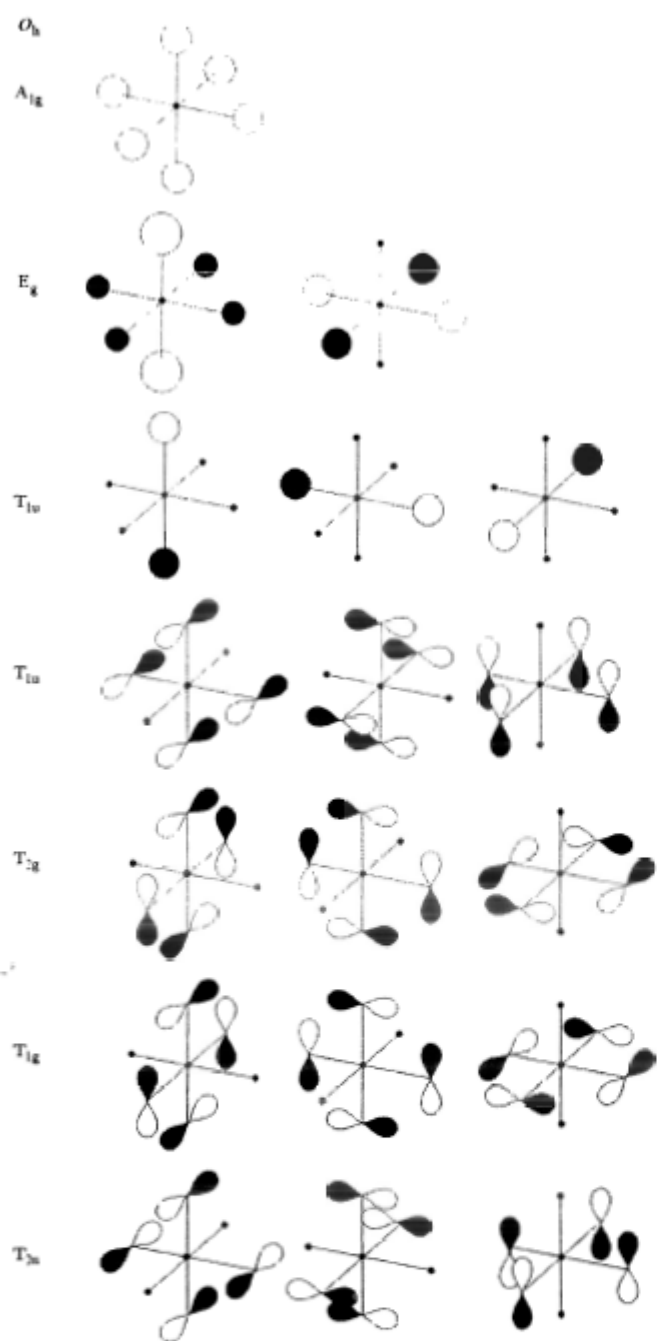
The icosahedral group

I	E	$12C_5$	$12C_2$	$20C_3$	$15C_2$	$h = 60$
$(\bar{5}32)$						
A_1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2 + z^2$
T_1	3	$\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$	0	-1	(x, y, z) (R_1, R_2, R_3)
T_2	3	$\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$	$\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$	0	-1	
G	4	-1	-1	1	0	
H	5	0	0	-1	1	$(2x^2 - y^2 - z^2, x^2 - y^2, xy, yz, zx)$

Symmetry-Adapted Orbitals







2024년 2학기 무기화학2 중간고사

1

(2024년 10월 21일 시행) 344반편

1

(2x24 = 48점)

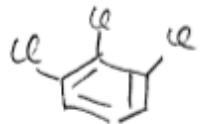
원자번호	원소기호	이름	족	주기
27	Co	Cobalt	9 (8B)	4
32	Ge	Germanium	14 (4A)	4
49	In	Indium	13 (3A)	5
50	Sn	Tin	14 (4A)	5
68	Er	Erbium	Lanthanide (lanthanide)	6
93	Np	Neptunium	Actinide (actinide)	7

2

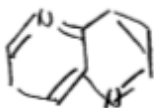
(a) chlorobenzene



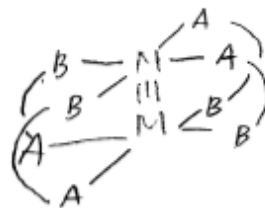
(b) 1,2,3-trichlorobenzene



(c)

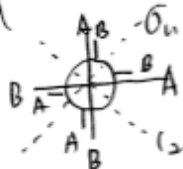


(d)



(3x16 = 48점)

	Point Group	Symmetry elements	chirality	Polarity
(a)	C_{2v}	$E, C_2, \sigma_v, \sigma_v'$	No	yes
(b)	C_{2v}	$E, C_2, \sigma_v, \sigma_v'$	No	yes
(c)	C_{2h}	E, C_2, i, σ_h	No	No
(d)	C_{2h}	E, C_2, i, σ_h	No	No



3

(8872)

5x8

3x8

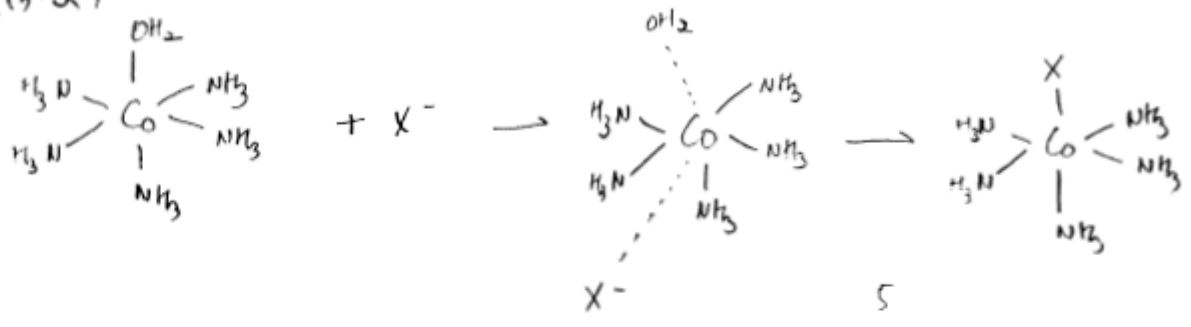
3x8

	Formula	Structures	Nomenclatures	optically active?
(a)	$[Ni(CO)_4]$ (Td 72)		tetracarbonylnickel(0)	No
(b)	$[Cr(NCS)_4(NH_3)_2]$ (Oh 72)		trans-diammine tetra isocyanato chromate(III) → thiocyanato	No
			cis - "	No
(c)	$[CoCl_2(en)(NH_3)_2]^+$ (Oh 72)		cis-diammine-cis-di- chloro ethylenediamine cobalt(III)	Yes
			trans-diammine-cis-di- chloro - "	No
			cis-diammine-trans-di- chloro - "	No
(d)	$[PtCl_2(NH_3)_2]$ (Sq. Pl 72)		trans-diammine di- chloroplatinum(II)	No
			cis - "	No

2번은 5x8과 3x8 둘 다 붙여 적으

4

(15점)



이 반응의 rate determining step은 leaving group인 H₂O ligand가 떠나게 나가는 것으로 생각할 수 있다. 따라서 entering group인 X⁻ ligand의 종류에 따라 반응 속도가 다른 영향을 받지 않는다 5

∴ Dissociative mechanism 5

5

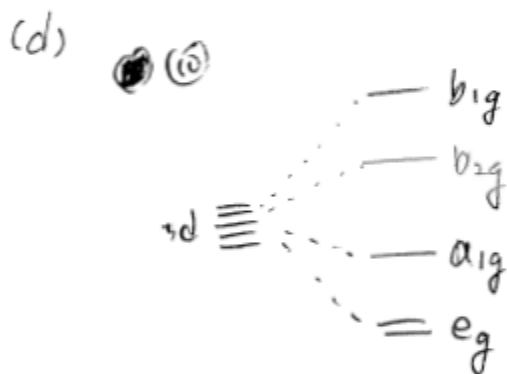
145
(5)

4

(a) $Pt(II)$, $5d^8$

(b) D_{4h} E_{2g} (c) E_{2g} 보류 0번.

(c) $5d$: A_{1g} , B_{1g} , B_{2g} , E_g
(d_{z^2}) (d_{xy}) (d_{xz}) (d_{yz})
 $6s$: A_{1g}
 $6p$: A_{1u} , E_u
(P_z) (P_x, P_y)

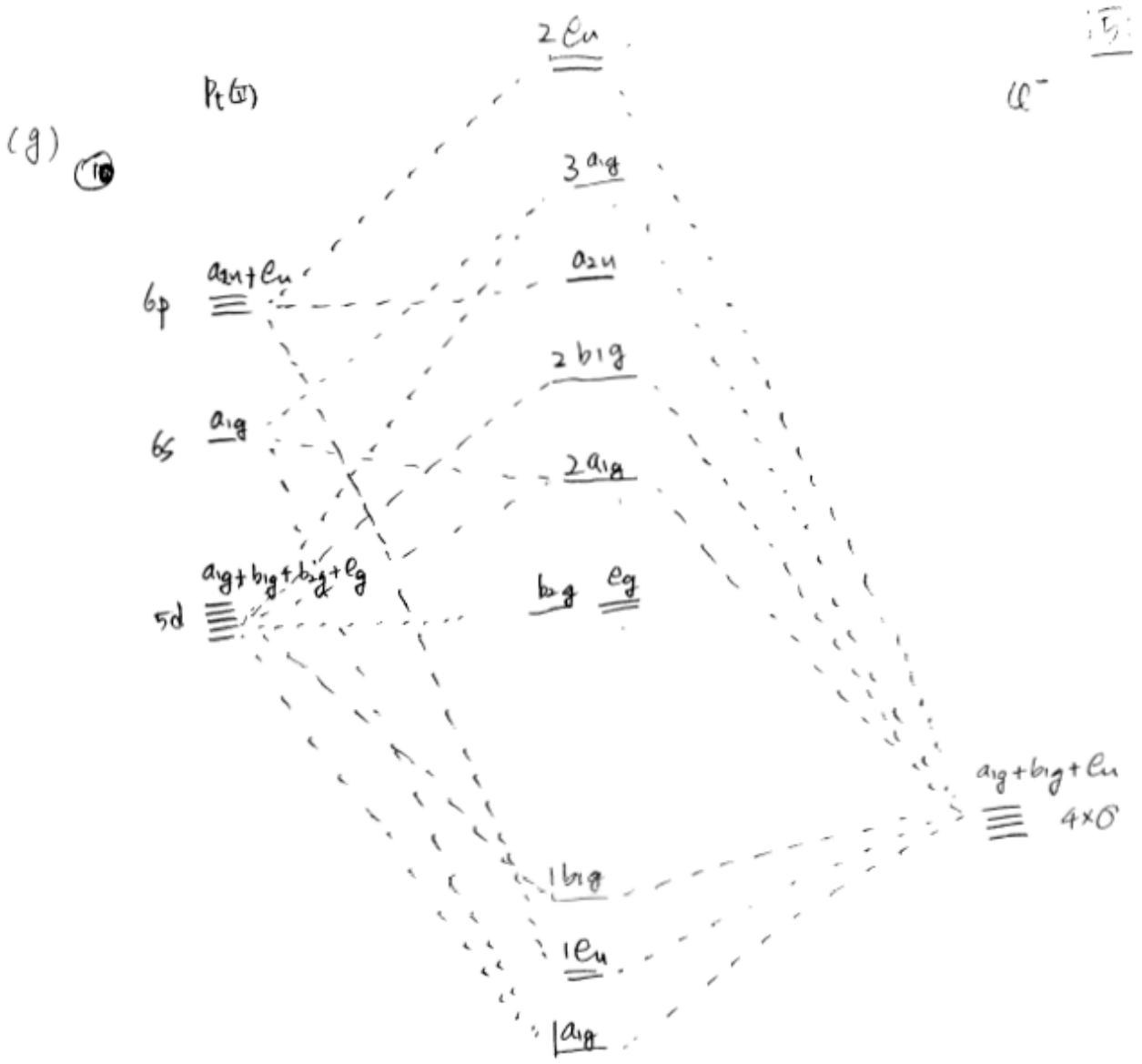


(e)

E_{2g} $\begin{array}{c} u \\ \downarrow \\ Pt \\ \uparrow \\ u \end{array}$

D_{4h}	E	$2G_4$	G_2	$2G_2'$	$2G_2''$	i	$2G_4$	G_h	$2G_v$	$2G_d$
Γ_6	4	0	0	2	0	0	0	4	2	0

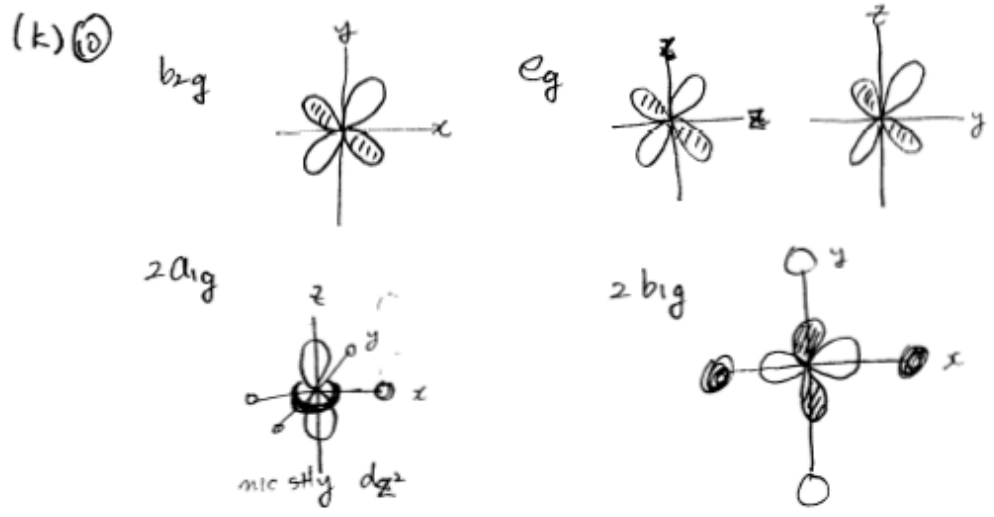
(f) $\Gamma_6 = A_{1g} + B_{1g} + E_u$

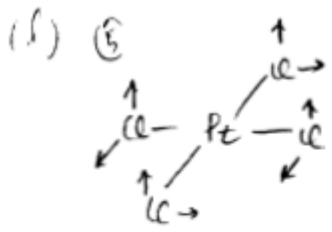


(h) $\text{⑤ } (1a_{1g})^2 (1e_u)^4 (1b_{1g})^2 (b_{2g})^2 (e_g)^4 (2a_{1g})^2$

(i) $\text{⑤ } 1a_{1g}, 1e_u, 1b_{1g}$

(j) $\text{⑤ } b_{2g}, e_g, 2a_{1g}, 2b_{1g}$





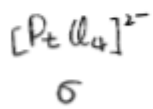
P_{4h}	E	$2G_4$	$2G_2$	$2G_2'$	$2G_2''$	i	$2G_a$	G_h	$2G_v$	$2G_d$
Γ_{π}	8	0	0	-4	0	0	0	0	0	0

(m)

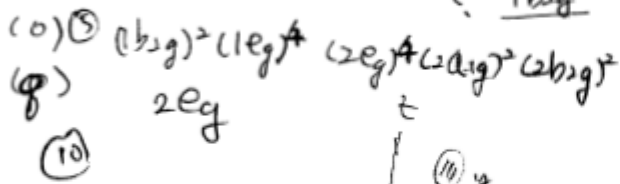
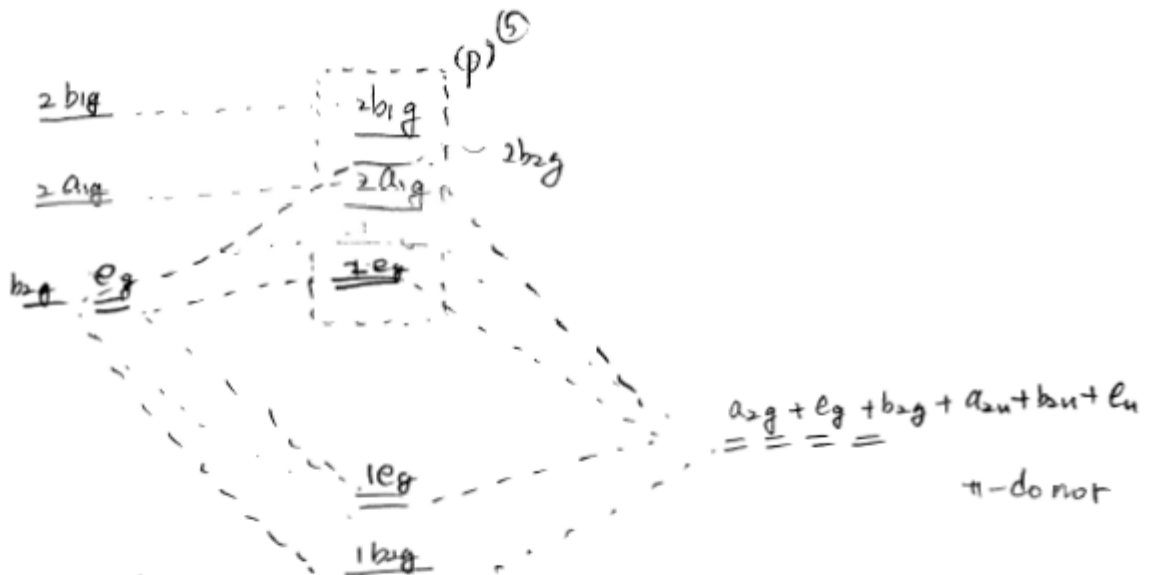
(i) $\Gamma_{\pi} \equiv A_{2g} + E_g + B_{2g} + A_{2u} + B_{2u} + E_u$

(n)

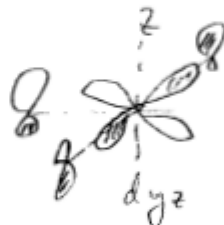
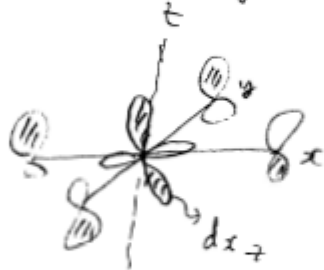
(i)



π



(i)



$2b_{1g} - (k) \rightarrow 2b_{1g} + (k)$

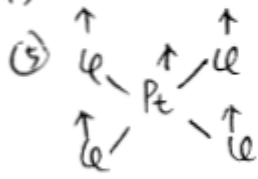
$2a_{1g} - (k) \rightarrow 2a_{1g} + (k)$

(r) ⑤ $3N - 6 = 3 \times 5 - 6 = 9 > 11$

(s) ⑤ out-of-plane vibration $5 - 3 = 2$

in-plane vibration $9 - 2 = 7 > 11$

(t)



D_{4h}	E	$2G_4$	G_2	$2G_2'$	$2G_2''$	$2G_2$	$2G_4$	G_h	$2G_v$	$2G_d$
Γ_{vib}	5	1	1	-3	-1	-1	-1	-5	3	1

(u) ⑤ $\Gamma_{vib} = E_g + 2A_{2u} + B_{2u}$

(v) ⑤ translation : A_{2u} (2) 2
 rotation : E_g (R_x, R_y) 2

(w) ⑤ A_{2u} : IR-active

B_{2u} : Both IR and Raman-inactive